

減衰全反射遠紫外分光法を用いた高分子表面の電子状態の研究

～実験と量子化学計算によるモデリング～

関西学院大学大学院理工学研究科

化学専攻 尾崎研究室 谷村恵里香

高分子の極表面の分析は物質の性質を決める鍵となるので、基礎・応用どちらにおいても重要である。しかし、物性研究で従来使われてきた、減衰全反射（ATR）-赤外分光分析では、物質表面から数・ μm が平均化された情報しか得られない。私は、表面わずか数十nm程度の電子スペクトルの情報が取得可能なATR-遠紫外（FUV）分光法が、新たな分析技術となり得ることに着目し、固体極表面分析用ATR-FUV分光器を新たに開発した。これを用い、高分子の中で最も基礎的な構造であるポリエチレンのATR-FUVスペクトル測定を行った。密度の異なるポリエチレンのATRスペクトルと透過スペクトルの比較、液体、固体アルカンとの比較、異なるサンプル作製法での比較から、電子状態と表面状態の変化の相関を得た。また、量子化学計算を用いてスペクトル変化がどのような物性や構造変化によるものか明らかにし、新しい分光分析法における基礎を確立した。